# Kobayashi-Warren-Carterモデルの数値解析 : 結晶粒界の可視化に向けて (数値解析学の最前線 : 理論・方法・応用)

AUTHOR(S):

榊原, 航也

数理解析研究所講究録 第2094巻 2018年 1-5



# Kobayashi-Warren-Carter モデルの数値解析 〜結晶粒界の可視化に向けて〜

榊原 航也

東京大学 大学院数理科学研究科

**概要**

本稿では，Kobayashi-Warren-Carter モデルに現れる，$SO(3)$ 値全変動流の数値解析手法を述べる．通常の全変動流と異なり，多様体に値を束縛されているため，汎函数の凸性が失われ，最小化問題を解くのが容易でなくなる．我々は，$SO(3)$ の接空間上に問題を定式化し直すことで，いくつかの有用な数値計算手法を得ることに成功した．同時に，ほぼオプティマルな誤差評価も得ることができた．本研究の内容は，上坂正晃氏（北海道大学)，儀我美一氏（東京大学)，田口和稔氏（東京大学）との共同研究に基づくものであり，論文 [2] に纏めているところである[*1]．

## 1 導入

我々が工業製品などを生産する際に用いる金属材料は，その材料全体で原子が規則正しい配列を持っているわけでなく，配列の向きが異なった領域（結晶粒）がいくつか集まった構造を持っており，多結晶と呼ばれる．この結晶粒の間にできる境界が結晶粒界である．結晶粒界は結晶粒間の “溝” であり，そこには不純物が紛れ込んだりする可能性が存在する．そこから工業製品を作る際のエネルギーロスが発生したり，結晶構造に対する思わぬ影響が現れたりする．従って，多結晶の構造が与えられたとき，そこから結晶粒界の場所を特定し，その時間発展の様子を正確に追跡できる数学的・数値的な枠組みを整備することができれば，その波及効果は非常に大きいことは想像に難くない．本稿での我々の目的は，結晶粒界を記述するある数理モデルに対して，簡便な数値解法を提示し，その収束解析の結果を提示することにある．

結晶粒界を記述する数理モデルはいくつか提案されている．その草分けは，材料科学者である Mullins による論文 [4] であり，縮退する結晶粒の運動が平均曲率流により記述されることを指摘した[*2]．その後，数学者により，平均曲率流方程式の解析が非常に盛んに行われているが，本稿はその解説をするのではなく，さらに洗練された別のモデルの話に移ることにしよう．我々が最終的に取り組みたいと考えているのは，**Kobayashi-Warren-Carter (KWC) モデル** [3] である．$\Omega \subset \mathbb{R}^D$ $(D \in \mathbb{N})$ を有界な Lipschitz 領域，$\nu^\Omega$

[*1] 本稿では，$SO(3)$ に値を束縛された全変動流方程式を考えるが，準備中の論文では，より一般に行列 Lie 群に値を束縛された状況を考えている．その場合の思想も，本稿と似ていることに注意されたい．

[*2] より正確に述べれば，結晶粒界の運動を記述するために，Mullins は平均曲率流方程式を導出した．

を $\partial\Omega$ の外向き単位法ベクトルとする．この時，KWC モデルは次で記述される：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \pi_{u(x,t)}\left(\nabla\cdot\left(\eta^2\dfrac{\nabla u}{|\nabla u|}\right)\right) & \text{in } \Omega\times(0,T), \\ \dfrac{\partial \eta}{\partial t} = \triangle\eta - \eta + 1 - 2\eta|\nabla u| & \text{in } \Omega\times(0,T), \\ \dfrac{\nabla u}{|\nabla u|}\cdot\nu^{\Omega} = 0,\ \nabla\eta\cdot\nu^{\Omega} = 0 & \text{on } \partial\Omega\times(0,T), \\ u(\cdot,0) = u_0,\ \eta(\cdot,0) = \eta_0 & \text{in } \Omega. \end{cases}$$

ここで，$u\colon \Omega\times[0,T)\to SO(3)$ は結晶の向きを表す函数，$\eta\colon \Omega\times[0,T)\to\mathbb{R}$ は秩序変数と呼ばれ，$\eta=1$ のところでは完全に結晶の向きが一致しており，$\eta=0$ のところでは全く異なっていることを表す．$SO(3)$ は

$$SO(3) = \{x\in \mathrm{Mat}(3) \mid xx^{\mathrm{T}} = x^{\mathrm{T}}x = I,\ \det x = 1\}$$

により定義される 3 次元回転群である．ただし，$\mathrm{Mat}(3) = \mathrm{Mat}(3;\mathbb{R})$ は 3 次実正方行列全体のなす空間を表す．$p\in SO(3)$ に対し，$\pi_p$ は $\mathbb{R}^9$ から，$p$ における $SO(3)$ の接空間 $so_p(3) := T_p(SO(3))$ への直交射影を表す．ここで，$SO(3)$ を $\mathbb{R}^9$ 内に埋め込まれた多様体と考え，$\mathrm{Mat}(3)$ と $\mathbb{R}^9$ とを同一視していることに注意されたい．$u_0\colon\Omega\to SO(3)$ は与えられた初期データである．上記の KWC モデルに対する有用な数値計算スキームを構築でき，かつその誤差評価まで出来れば文句の付け所がないが，この問題はそこまで単純でない．困難な点は色々とあるが，ここで指摘したいのは，$u$ の時間発展を記述する式が $SO(3)$ に値を束縛された全変動流であることである．このように，多様体に値を束縛された偏微分方程式を数値計算することはそれほど単純なことでなく，特に，KWC モデルに現れるような強い特異性を持つ場合に成功している例はほとんど存在しない．そこで，本稿での目的は，KWC モデルの数値解析を目指す第一歩として，次の $SO(3)$ 値全変動流方程式に対する数値計算手法を開発し，かつその誤差解析を与えることとしたい：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = -\pi_{u(x,t)}\left(-\nabla\cdot\dfrac{\nabla u}{|\nabla u|}\right) & \text{in } \Omega\times(0,T), \\ \dfrac{\nabla u}{|\nabla u|}\cdot\nu^{\Omega} = 0 & \text{on } \partial\Omega\times(0,T), \\ u(\cdot,0) = u_0 & \text{in } \Omega. \end{cases} \tag{HF; $u_0$}$$

## 2　空間離散化問題

問題 (HF; $u_0$) は，形式的には全変動

$$\Phi(u) = \int_{\Omega} |\nabla u|\,\mathrm{d}x, \quad u\in BV(\Omega; SO(3))$$

の勾配系と見なされる．従って，全変動の最小化を実行すれば良いことになるが，これをそのまま愚直に実行することは困難である．故に，本稿では，空間離散化した全変動の最小化問題を考えることにしたい．つまり，次で定義される，領域 $\Omega\subset\mathbb{R}^D$ の直方体分割を与え，その上で定義される区分定数 $SO(3)$ 値函数に対する全変動を考える．

**定義 2.1.** $\Omega$ の部分集合の族 $\Omega_\Delta = \{\Omega_\alpha\}_{\alpha\in\Delta}$ が $\Omega$ の**直方体分割**であるとは，以下の 3 条件を満たすことと定義される：

1. $\bigcup_{\alpha\in\Delta}\Omega_\alpha = \Omega$;

2. $\alpha, \beta \in \Delta$, $\alpha \neq \beta$ ならば $\Omega_\alpha \cap \Omega_\beta = \emptyset$;
3. 各 $\alpha \in \Delta$ に対して，$\mathbb{R}^D$ 内の直方体 $R_\alpha$ が存在し，$\Omega \cap R_\alpha = \Omega_\alpha$ が成り立つ．

以下，$\Omega$ の直方体分割 $\Omega_\Delta = \{\Omega_\alpha\}_{\alpha \in \Delta}$ を 1 つ取り固定する．そして，$\Omega_\Delta$ に関連づけられた，区分定数 $\mathrm{Mat}(3)$ 値函数のなす空間 $H_\Delta$ を，次で定義する：

$$H_\Delta = \left\{ u = \sum_{\alpha \in \Delta} u^\alpha 1_{\Omega_\alpha} \;\middle|\; u^\alpha \in \mathrm{Mat}(3),\ \alpha \in \Delta \right\}.$$

この時，$u \in H_\Delta$ の全変動は次のように計算される：

$$\Phi_\Delta(u) = \sum_{(\alpha,\beta)=1} \|u^\alpha - u^\beta\|_{\mathrm{F}} \mathcal{H}^{D-1}(\partial\Omega_\alpha \cap \partial\Omega_\beta).$$

ただし，$\|\cdot\|_{\mathrm{F}}$ は Frobenius ノルム，$\mathcal{H}^{D-1}$ は $D-1$ 次元 Hausdorff 測度を表す．こうして，我々が取り組む空間離散化問題を数学的に正確に記述できるようになった．そのために，区分定数 $SO(3)$ 値函数のなす空間 $H_\Delta(SO(3))$ を，$H_\Delta$ と同様に定義しておこう：

$$H_\Delta(SO(3)) = \left\{ u = \sum_{\alpha \in \Delta} u^\alpha 1_{\Omega_\alpha} \;\middle|\; u^\alpha \in SO(3),\ \alpha \in \Delta \right\}.$$

また，$u \in H_\Delta(SO(3))$ に対し，直交射影 $P_u \colon H_\Delta \to H_\Delta(SO(3))$ を次で定義する：

$$(P_u U)^\alpha := \pi_{u^\alpha} U^\alpha, \quad \alpha \in \Delta;\ U \in H_\Delta.$$

**定義 2.2.** $u_0 \in H_\Delta(SO(3))$, $I := [0, T)$ とする．この時，写像 $u \in W^{1,2}(I; SO(3))$ が (HF; $u_0$) の空間離散化モデルの解であるとは，次が満たされることと定義される：

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} \in -P_{u(t)} \partial\Phi_\Delta(u(t)) & \text{for a.e. } t \in (0, T), \\ u(0) = u_0. \end{cases} \tag{DHF; $u_0$}$$

ただし，$\partial\Phi_\Delta$ は $H_\Delta$ における $\Phi_\Delta$ の劣微分を表す．

**注意 2.3.** 考えている領域のメッシュ分割を考えることにより空間離散化問題を導出しているが，数学的には，“メッシュを細かく，つまり $\max_\alpha \mathrm{diam}(\Omega_\alpha) \to 0$ の極限で (DHF; $u_0$) の解は (HF; $u_0$) の解に収束するか” という問題が気になるところである．この問題に答えることが本稿の目的ではなく，また実際に成り立つのか成り立たないのかも不明である[*3]．一方で，カラー画像からのノイズ除去などでは，ボクセル単位で情報が与えられるので，自然と今回考えている空間離散化問題にたどり着く．また，結晶粒界を考えたとしても，結晶の向きのデータは連続的ではなく離散的に取得されるものであり，この場合も空間離散化問題にたどり着く．従って，メッシュを細かくした時の解の振る舞いには今回は関与せず，あくまでも空間離散化問題自身を取り扱い，その有用な数値計算手法を開発し，解析することを本稿の目標としている．

定義 2.2 に鑑みれば，[1] に従うことで，(DHF; $u_0$) に対する次の数値計算スキームが得られる．$\tau > 0$ を時間ステップサイズ，$N(\tau)$ を $T/\tau$ を以上の最小の整数とする．

**スキーム I.** $H_\Delta(SO(3))$ 内の列 $\{\hat{u}^n_\tau\}_{n=0}^{N(\tau)}$ を次で定める：

[*3] おそらく (HF; $u_0$) の解には収束しないのではないか，との意見をいただいている．

1. $\hat{u}_\tau^0 = u_0$.
2. $n = 1, 2, \ldots, N(\tau) - 1$ に対して,

$$\hat{u}_\tau^{n+1} \in \underset{u \in H_\Delta(\hat{u}_\tau^n)}{\operatorname{argmin}} \ \Phi_\Delta^\tau(\hat{u}_\tau^n; u).$$

ただし,

$$\Phi_\Delta^\tau(u; v) = \Phi_\Delta(v) + \frac{1}{2\tau}\|u - v\|_{H_\Delta}^2, \quad (u, v) \in H_\Delta(SO(3)) \times H_\Delta(SO(3)).$$

## 2.1 局所化を伴う陰的スキーム

スキーム I では,$\Phi_\Delta^\tau$ が中心的な役割を果たしている.しかしながら,$\Phi_\Delta^\tau$ は $H_\Delta(SO(3)) \times H_\Delta(SO(3))$ 上で定義されており,各メッシュ上で $SO(3)$ に値を束縛される条件のために,実際に最小化問題を解くことは決して易しくない.そこで,$\Phi_\Delta^\tau$ を局所化することで,より扱いやすいものにすることを考える.

我々は,Lie 代数の言葉を用いて,$\Phi_\Delta^\tau$ を局所化する.具体的な方法を述べる前に,いくつか準備をしておこう.$x \in SO(3)$ に対し,$x$ での $SO(3)$ の接空間 $so_x(3)$ から $SO(3)$ への指数写像を $\exp_x$ と表す.具体的には,次式で与えられる:

$$\exp_x(X) = x \exp(x^{\mathrm{T}} X), \quad x \in SO(3), \ X \in so_x(3).$$

ただし,右辺の exp は,行列の指数函数を表していることに注意されたい.また,$u \in H_\Delta(SO(3))$ における $H_\Delta(SO(3))$ の接空間 $H_\Delta(u)$ を次で定義する:

$$H_\Delta(u) = \left\{ \sum_{\alpha \in \Delta} U^\alpha 1_{\Omega_\alpha} \ \middle| \ U^\alpha \in so_{u^\alpha}(3), \ \alpha \in \Delta \right\}.$$

そして,$u \in H_\Delta(SO(3))$ に対し,$H_\Delta(u)$ から $H_\Delta(SO(3))$ への指数写像 $\mathrm{Exp}_u$ を次で定義する:

$$\mathrm{Exp}_u U = \sum_{\alpha \in \Delta} (\exp_{u^\alpha} U^\alpha) 1_{\Omega_\alpha}, \quad U \in H_\Delta(u).$$

さて,以上の準備の下で,我々の局所化の方法は,次のように記述される.$u \in H_\Delta(SO(3))$ が与えられたとき,ある $U \in H_\Delta(u)$ を用いて,$v = \mathrm{Exp}_u U$ と表現されると仮定する.$v$ と $u$ が十分近い,言い換えれば,$\|U\|_{H_\Delta}$ が十分小さいならば,指数函数の線型近似の要領で,$v \approx u + U$ なる近似が成り立つことが期待される.そこで,この近似が有効であると考え,$\Phi_\Delta^\tau(u; v)$ の $v$ の部分に $u + U$ を代入して得られるものを $\Phi_{\Delta,\mathrm{loc}}^\tau$ と書くことにする:

$$\Phi_{\Delta,\mathrm{loc}}^\tau(u; U) = \Phi_\Delta(u + U) + \frac{1}{2\tau}\|U\|_{H_\Delta}^2, \quad u \in H_\Delta(SO(3)), \ U \in H_\Delta(u).$$

この局所化のお陰で,$\Phi_{\Delta,\mathrm{loc}}^\tau(u; U)$ は $U \in H_\Delta(u)$ について凸になっていることを強調しておく.こうして,次の数値計算スキームを得ることができる:

**スキーム II.** $H_\Delta(SO(3))$ 内の列 $\{u_\tau^n\}_{n=0}^{N(\tau)}$ を次で定める:

1. $u_\tau^0 = u_0$.
2. $n = 1, 2, \ldots, N(\tau) - 1$ に対して,

$$u_\tau^{n+1} = \mathrm{Exp}_{u_\tau^n} U_\tau^{n+1}.$$

ただし,

$$U_\tau^{n+1} = \underset{U \in H_\Delta(u)}{\operatorname{argmin}} \ \Phi_{\Delta,\mathrm{loc}}^\tau(u_\tau^n; U).$$

## 3 誤差評価

本節で，スキーム II により得られた解 $\{u_\tau^n\}_{n=0}^{N(\tau)}$ に対する誤差評価を，結果のみ述べる形で与える．時間区間 $I := [0,T)$ ならびに時間刻み幅 $\tau > 0$ は与えられているとする．このとき，

$$t_n := \begin{cases} n\tau & \text{if } n = 0,1,\dots,N(\tau)-1, \\ T & \text{if } n = N(\tau) \end{cases}$$

とおき，時間補間函数 $\{\ell_\tau^n\}_{n=0}^{N(\tau)-1}$, $\ell_\tau \colon I \to [0,1]$ を，それぞれ次で定義する：

$$\ell_\tau^n(t) := \frac{t-t_n}{\tau} 1_{[t_n,t_{n+1})}, \quad \ell_\tau(t) := \sum_{n=0}^{N(\tau)-1} \ell_\tau^n(t).$$

そして，$\{u_\tau^n\}_{n=0}^{N(\tau)}$ の Rothe 補間 $u_\tau \colon I \to H_\Delta(SO(3))$ を次で定義する：

$$u_\tau := \sum_{n=0}^{N(\tau)-1} \left(\mathrm{Exp}_{u_\tau^n} \ell_\tau^n U_\tau^{n+1}\right) 1_{[t_n,t_{n+1})}.$$

これは，多様体 $H_\Delta(SO(3))$ 上での線型補間に他ならない．このとき，我々の主結果は，次のように述べられる．

**定理 3.1.** 初期データ $u_0 \in H_\Delta(SO(3))$ に対し，$\{u_\tau^n\}_{n=0}^{N(\tau)} \subset H_\Delta(SO(3))$ をスキーム II により得られたものとし，$u_\tau$ をその Rothe 補間とする．このとき，ある正定数 $C = C(\Omega_\Delta)$, $D = D(\Omega, \tau)$ が存在し，次の誤差評価が成り立つ：

$$\|u_\tau(t) - u(t)\|_{H_\Delta}^2 \le t\mathrm{e}^{tC} D\tau.$$

この定理の証明には，発展変分不等式を用いるが，その詳細については，現在準備中の論文 [2] に委ねることとしたい．

### 謝辞

本講演の機会を与えてくださった，渡部善隆先生ならびに田上大助先生に深く感謝申し上げます．また，本研究は，科学研究費補助金（No. 26220702）の助成を受けています．

## 参考文献

[1] Ambrosio, L.; Gigli, N.; Savaré, G.; Gradient flows in metric spaces and in the space of probability measures. *Birkhäuser Verlag*, 2008.

[2] Giga, Y.; Sakakibara, K.; Taguchi, K.; Uesaka, M.; Numerical schemes for $SO(3)$-valued discrete one-harmonic equation and their validation. *in preparation.*

[3] Kobayashi, R.; Warren, J. A.; Carter W. C.; A continuum model of grain boundaries. *Phys. D* **140** (2000), no. 1–2, 141:150.

[4] Mullins, W. W.; Two-dimensional motion of idealized grain boundaries. *J. Appl. Phys.* **27** (1956), 900:904.